

Methodik zur Bestimmung des Diffusionskoeffizienten

Dumbadse, A. A.

Der folgende Artikel stellt einen Beitrag eines georgischen Wissenschaftlers aus der Technischen Universität Tbilissi dar, der die Forschungsschwerpunkte des Instituts für Maschinenwesen nur am Rande berührt. Die numerische Umsetzung der Integralgleichung und die Lösung mit Hilfe der Randelemente ist eine Methode, wie sie bei anderen Aufgaben, z.B. der Festigkeitsbetrachtung oder der dynamischen Verhaltensanalyse von Maschinenteilen im IMW angewendet werden.

This contribution of a Georgian scientist, who is in good contact with IMW, does not focus the inner circle of our interests. Nevertheless, the interesting method of formulating and evaluating problems of differential equations by boundary element methods is common in IMW in the calculation of the static and dynamic behaviour of machine elements.

1 Lösung des Flüssigkeitsdiffusionsproblems bei Polymermaterial durch die Randelementmethode

Die vorgeschlagene Methodik zur Bestimmung des Flüssigkeitsdiffusionskoeffizienten von Polymermaterial basiert auf der Lösung der Diffusionsgleichung für den achsensymmetrischen Probenkörper des Polymermaterials nach der Methode der Randelemente.

Gemäß dem Berechnungsprofil der Flüssigkeitskonzentration im Probekörper wird die Kinetik des Probekörperanschwellens bestimmt, die mit der im einfachsten Experiment erhaltenen gegenübergestellt wird.

Schreiben wir die Diffusionsgleichung auf:

$$\frac{C}{t} = D \nabla^2 C \quad (1.1)$$

wobei C - Flüssigkeitskonzentration ist; D - der Flüssigkeitsdiffusionskoeffizient im untersuchten Polymermaterial; T - Zeit; ∇^2 - Laplace Operator.

Es wird vermutet, daß der Diffusionskoeffizient von der Spannungsgröße nicht abhängig ist.

Für die Probenkörper-Ringe, an denen die Bestimmung des Diffusionskoeffizienten für eine Plastikröhre zweckmäßig auszuführen ist, erhalten wir Gleichungslösung (1.1) mit folgenden Grenzbedingungen erster Art:

Auf der Oberfläche S_1 ist die Flüssigkeitskonzentration $C = C^*$ aufgegeben. Die Grenzbedingung zweiter Art auf der Oberfläche S_2 wird durch die Gleichung

$$D \frac{C}{n} = q + (C - \bar{C}) \quad (1.2)$$

aufgestellt.

In dieser Gleichung sind folgende Bezeichnungen gewählt: q - Dichte des Diffusionsstromes; $-Nu \cdot D/d$ - Masseausgabekoeffizient; Nu - Nusselt Zahl; d - charakteristisches Probenkörperausmaß; C - Flüssigkeitskonzentration in der Umwelt.

Im beschriebenen Fall wird $q = 0$ angenommen. Für die Aufgabenlösung ist es in diesem Fall notwendig zwei Parameter des Prozesses aufzustellen:

Diffusionskoeffizient D und Massenausgabekoeffizient, die mit dem Diffusionskoeffizient durch die Nusselt Zahl Nu verbunden sind und dem charakteristischen Probenkörperausmaß d . Zur Bestimmung von d im Wärmedurchgang wird das Verhältnis

$$d = \frac{S}{P}$$

empfohlen, wo S - die Fläche ist, durch die der Massen- und Wärmeaustausch mit der Umwelt durchgeführt wird; P - Schnittperimeter vom untersuchten Prüfkörper.

Bei der rein molekularen Übertragung ist Nu eine konstante Größe, die von der Prüfgeometrie abhängig ist und im Bereich von 2 - 4 liegt. Anfangsbedingung: $C(0) = C^*$.

Zur Lösung der Diffusionsgleichung wird die Randelementmethode nach Galerkins Schema mit der Ausnutzung einer "Schwachen" Form verwendet /1, 2/

$$\dot{A}C + KC = G \quad (1.3)$$

wobei gilt:

$$\dot{A}C = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^M \frac{C_e}{t} v_e dv_n$$

$$KC = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^M DC_e v_e i_e j_e dv_n + \sum_{e=1}^m C_e S_2 ds_n$$

$$G = \sum_{n=1}^N \sum_{L=1}^n \sum_{m=1}^M \bar{C} ds_n$$

In diesen Verhältnissen ist

$$n_L = 1$$

wenn n_L

und

$$n_L = 0$$

wenn n_L

$m = 1, M$

$j, e = 1, 3$

$\beta = 1, B_n$

$i = 1, 3$

$j =$ Basisfunktionen

$N, M =$ Simplex- und Knotenzahl im Bereich

$L =$ Elementenmenge, der Approximation der

Oberfläche S_2 vom Prüfkörper

$B_n =$ Zahl der Simplexeinheiten n , die sich auf der

Oberfläche des Körpers befinden

$C_j =$ Konzentration im Knoten j

$\frac{j}{m} =$ Bulews - Prozedur

$$\frac{j}{m} = 1$$

wenn j n der m P Knoten entspricht.

In allen anderen Fällen gilt:

$$\frac{j}{m} = 0$$

Zur Lösung der evolutionären Aufgabe wurde das Krank-Nikolsons Schema benutzt, daß für (1.3) folgendes Ergebnis liefert:

$$A \frac{C_{j-1} - C_j}{t_{j+1}} + KC_{j+1} = G \quad (1.4)$$

mit

$$t_{j+1} = t_{j+1} - t_j$$

Die Bestimmung von D wird nach dem folgenden Schema durchgeführt. Es wird die Anfangsbedeutung D_0 aufgegeben, damit werden Konzentrationsprofile im Prüfkörper und Anschwellungsgrad W in der Abhängigkeit von der Zeit berechnet. Dann vergleicht man die berechnete Abhängigkeit mit der experimentellen und beginnt mit weiteren Iterationen.

2 Programm zur Berechnung des Konzentrationsprofils im Prüfkörper und des Anschwellungsgrads vom Polymer

Der Algorithmus der beschriebenen Lösung ist als FORTRAN-Programm für einen PC - Typ IBM-AT als zusammengestelltes Programmpaket verwirklicht worden.

Der entwickelte Programmkomplex besteht aus zwei absoluten Modulen, die mit "govv.exe" und "r3mtv.exe" bezeichnet sind. Mit dem ersten von ihnen läßt sich nichtstationäre Masseübertragung in den achsensymmetrischen Körper berechnen. Das zweite Modul ist zur Berechnung des gespannt-deformierten Zustands vom achsensymmetrischen Körper bestimmt, unter der Berücksichtigung der Einwirkung der diffundierenden Flüssigkeit auf die Eigenschaften des Polymermaterials.

Struktur des Programmkomplexes:

- Vorbereitung und Eingabe der Anfangsdaten.
- Erstellung des Randelementenetzes
- Aufstellung der Gleichungssystemmatrix
- Bestimmung des Außenbelastungsvektors
- Berücksichtigung der Grenzbedingungen
- Lösung des Gleichungssystems
- Berechnung der nötigen Charakteristiken in den Knoten des Randelementenetzes
- Ausgabe der Berechnungsergebnisse

Vor der Fileeingabe "govv.exe" muß unbedingt ein File mit den Ausgangsdaten vorbereitet werden. Der Fileaufbau ist beschrieben im Komplex- ft 13. Die Ausgangsdaten zur Berechnung des nicht stationären Prozesses der Massenübertragung und Anschwellungskinetik sind folgende:

1. Knotenzahl an der Grenze des betrachteten Bereichs (nb)
2. Dimensionsmassiv bnod(), das die Nummer dieser Knoten in der Bypassordnung gegen den Uhrzei-

gersinn enthält. Die Massivelemente werden ins Format 216 eingeschrieben.

3. Massive $z(\)$ und $R(\)$, in die die Grenzknotenkoordinaten im Format 2E12.3 eingetragen werden.

4. Grenzknotenanzahl $kgrx$, in denen die Grenzbestimmungen der I. Art aufgegeben sind (Konzentrationswerte). Wenn solche Knoten vorhanden sind, so ist es notwendig $Massiv\ volx(\)$ mit den entsprechenden Konzentrationswerten aufzustellen. Diese Massive werden in den Formaten I6 und E12.3 zusammenformiert. Wenn solche Massive nicht vorhanden sind, ist unbedingt $kgrx = 0$ einzugeben.

5. Zahl der Knotenpaare (Grenzelementenseiten), $kgrp$, auf denen die Grenzbedingungen der II. Art aufgegeben sind - es sind Massenfluß und Masseausgabekoeffizient bestimmt. Das Massiv, in das die untersuchten Paare eingetragen werden, wird mit IURZ() bezeichnet. E wird im Format Z 16 formiert.

6. Die Zahl der Knotenpaare (Grenzelementenseiten), auf denen die Grenzbedingungen der III. Art aufgegeben sind. Das Massiv IUP3() schließt die im Format Z16 eingetragenen Nummern von diesen Knoten ein.

7. Konstantenbezeichnungen lam , alz , tz , gz - entsprechen dem Diffusionskoeffizienten, Masseausgabekoeffizienten, der Flüssigkeitskonzentration in der Umwelt und dem Massenfluß. Diese Konstanten werden nach dem Format 4 E 12.3 eingetragen.

8. Maximale Schrittzahl in der Zeit $ns\ max$, die 250 nicht überschreiten soll, und die Schritte in der Zeit tau werden in die Formate I 6 und E 12.3 eingetragen

Die Formierung des Randelementenetztes wird durch die Unterprogramme TRIIRA, KRISSP und MATRJ 1 durchgeführt.

Der Aufbau der Außenbelastungsvektoren wird mit der Verwendung des Unterprogramms GNDSOS durchgeführt.

Zur Lösung der linearen algebraischen Gleichungssysteme, die symmetrisch, positiv bestimmt, zugelassen sind, sind die Programme SOLVE 1 und SOLVE 2 vorgesehen. In der Methode ist die effektive, gerade Faktorisierungsmethode LDL^T verwendet. Alle Ergebnisse werden als Tabelle der Werte von Flüssig-

keitskonzentrationen in den Randelementeknoten, und auch als Kennlinien des Regelabstandes von den bestimmten Konzentrationswerten dargestellt. Für diesen Zweck sind die Unterprogramme VISUAL, MENU 5 bb 1 im Komplex ausgenutzt.

3 Bestimmung des Diffusionskoeffizienten von Pretroleum in den Plastikrohrleitungen

Die angebotene Methodik ist zur Bestimmung der Diffusionskoeffizienten von Pretroleum in Plastikrohrleitungen ausgenutzt worden. Der innere Durchmesser der Rohrleitung ist 44 mm, der äußere 51 mm. Die experimentelle Untersuchung der Anschwellungskinetik dieses Materials in Petroleum wurde an ringförmigen Prüfkörpern, mit der Höhe von 10 mm durchgeführt. Die Anfangsmasse der Prüfkörper war ungefähr 6 g. Die Prüfkörper wurden vom Plastikrohr abgeschnitten. Die Dauer des Experiments war 5 Stunden. Nach jeder Stunde wurden die Körper gewogen. Der Anschwellungsgrad wurde wie ein relativer Zuwachs der Probenmasse infolge der Petroleumdiffusion bestimmt.

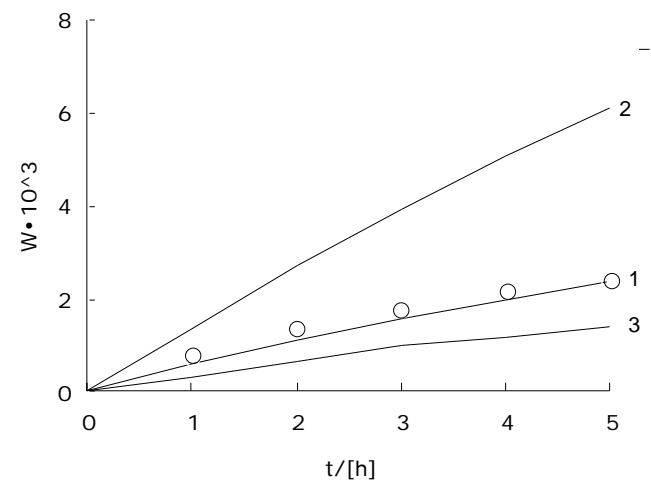


Bild 1: Anschwellungsgrad von Polyäthylen in Petroleum als Funktion der Zeit.

o = Experiment

1 = Berechnet mit $D=2 \cdot 10^{-13} \text{ m}^2/\text{s}$, $Nu=3,66$

2 = Berechnet mit $D=2 \cdot 10^{-13} \text{ m}^2/\text{s}$, $Nu=10$

3 = Berechnet mit $D=2 \cdot 10^{-13} \text{ m}^2/\text{s}$, $Nu=2$

Auf **Bild 1** ist die Abhängigkeit des Anschwellungsgrades von der Zeit im Untersuchungsprozeß dargestellt. Auf der Abbildung sind auch die berechneten Abhängigkeiten des Anschwellungsgrades aufgetragen, die bei den verschiedenen Werten des Diffusionskoeffizienten und bei der Nusselt Zahl Nu enthalten sind. Wie aus den angeführten Angaben zu sehen

ist, liegt die experimentelle Abhängigkeit des Anschwellungsgrades sehr nah an den berechneten Ergebnissen bei denen folgende Parameterwerte zugrundegelegt wurden: $D = 2 \cdot 10^{-13} \text{ m}^2/\text{s}$; $Nu = 3,66$. Die angenommene Größe Nu entspricht dem Zylinderrohr mit allseitigem Wärme- und Massenaustausch. Wie aus den angeführten Angaben zu sehen ist, ist die Genauigkeit der Diffusionskoeffizientenbestimmung mit der Ausnutzung der vorgeschlagenen Methodik von der Richtigkeit der Auswahl von dem entsprechenden Wert der Nusseltkriteriums Nu bedeutend abhängig.

4 Schlußfolgerung

I Es ist eine Methodik für die Bestimmung des Diffusionskoeffizienten von flüssigen Medien in polymere Materialien aufgestellt worden, die auf der Lösung der nichtstationären Masseübertragung im festen Körper mit Hilfe der Randelementemethode und auf der Analyse der Materialanschwellungskinetik in dem untersuchten Medium basiert.

II Es ist ein Programm zur Realisation der Randelementemethode entwickelt worden, für die Lösung des Problems der Masseübertragung in achssymmetrischen Körpern.

III Mit Anwendung der vorgeschlagenen Methodik ist der Wert des Petroleumdiffusionskoeffizienten in der Polyäthylenrohrleitung bestimmt worden.

IV Die Genauigkeit der Bestimmung des Diffusionskoeffizienten nach der vorgeschlagenen Methodik ist von der Richtigkeit der Auswahl des entsprechenden Wertes des Nusselt-Kriteriums abhängig.

V Es scheint zweckmäßig aufgrund der erhaltenen Ergebnisse eine Bewertungsmethodik für die Wirkung der Diffusion des flüssigen Mediums auf den gespannten deformierten Zustand der Konstruktionen aus Polymermaterialien zu erarbeiten. Dazu gehört auch die Methodik der experimentellen Untersuchung der Wirkung von mechanischen Belastungen auf den Masseübertragungsprozeß in den Polymermaterialien.

Literatur

/1/ Brichal, J.D.; Kelly, A.: New inorganic materials, "Sci. Amer.", 1983, v. 248, N 5, p. 88-95

/2/ Flagg, D.L.; Grossman, F.W.: Analysis of viscoelastic response of composite laminate during hydrothermal exposure, J. of Comp. Mater., 1981, v. 15, N 1, p. 21-40

/3/ Crank, J.: The mathematics of diffusion, Oxford, 1956, 350 p.